

1.) Zeitentwicklung in der Quantenmechanik

• vollständig beschrieben durch SGL: $i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H(t) |\Psi(t)\rangle$

1.) Die Wahrscheinlichkeit ist zeitlich erhalten: $\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = 0$

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = \left(\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \right) |\Psi(t)\rangle + \langle \Psi(t) | \left(\frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle \right)$$

$$\text{SGL} \cdot \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} H(t) |\Psi(t)\rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | = +\frac{i}{\hbar} H^\dagger(t) \langle \Psi(t) | \quad \text{mit } H = H^\dagger$$

$$= \frac{i}{\hbar} H(t) \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle - \frac{i}{\hbar} H(t) \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = 0 //$$

2.) Zeitentwicklungsoperator $U(t, t_0)$:

→ es existiert ein Operator $U(t, t_0)$: $|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle$ nach 1)

→ Erwartungswert $\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(t_0) | \underbrace{U^\dagger(t, t_0) U(t, t_0)}_{= \mathbb{1}} | \Psi(t_0) \rangle = \langle \Psi(t_0) | \Psi(t_0) \rangle$
 $= \mathbb{1} \Rightarrow U(t, t_0)$ ist **unitär** $U^\dagger U = \mathbb{1}$

$$|\Psi(t_0)\rangle \rightarrow |\Psi(t_1)\rangle \rightarrow |\Psi(t_2)\rangle = \begin{cases} U(t_2, t_1) |\Psi_1(t)\rangle = U(t_2, t_1) U(t_1, t_0) |\Psi(t_0)\rangle \\ U(t_2, t_0) |\Psi_0(t)\rangle \end{cases}$$

$$\Rightarrow U(t_2, t_0) = U(t_2, t_1) U(t_1, t_0)$$

$$|\Psi(t_0)\rangle \rightarrow |\Psi(t_1)\rangle \rightarrow |\Psi(t_2)\rangle = \begin{cases} U(t_0, t_1) |\Psi_1(t)\rangle = U(t_0, t_1) U(t_1, t_0) |\Psi(t_0)\rangle \\ \mathbb{1} |\Psi_0(t)\rangle \end{cases}$$

$$\Rightarrow U^\dagger(t_0, t_1) = U(t_1, t_0)$$

Darstellung von $U(t, t_0)$: mit $\hat{H}(t) = \hat{H}$ zeitunabhängig

$$\Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle = H U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} U(t, t_0) = -\frac{iH}{\hbar} U(t, t_0) \quad \text{DGL 1. Ordnung} \quad \boxed{U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)}} \quad \text{mit } U(t_0, t_0) = \mathbb{1}$$

$$\text{umkehr! (L\u00f6sungstreue)} \quad = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)\right)^n$$

mit zeitabh\u00e4ngigem $\hat{H}(t)$

$$\frac{d}{dt} U(t, t_0) = \frac{1}{i\hbar} H(t) U(t, t_0) \quad \int \dots dt'$$

$$\Rightarrow \underbrace{\int_{t_0}^t \frac{d}{dt'} U(t', t_0) dt'}_{U(t, t_0) - U(t_0, t_0)} = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t H(t') U(t', t_0) dt'$$

$$\Rightarrow \boxed{U(t, t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t H(t') U(t', t_0) dt'}$$

$$\uparrow \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^{t'} H(t'') U(t'', t_0) dt'' \quad t'' < t'$$

$$\Rightarrow \boxed{U(t, t_0) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) \dots H(t_n)}$$

$$\uparrow \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \dots$$

\(\rightarrow\) Dyson-Reihe \(\uparrow\) wichtig in der zeitabh\u00e4ngigen St\u00f6rungsrechnung

Zeitentwicklung des Erwartungswertes

$$\langle \hat{A} \rangle (t) = \langle \psi(t) | \hat{A}(t) | \psi(t) \rangle \quad \text{hier: } \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle &= \left(\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right) \hat{A}(t) | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \hat{A}(t) \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}(t) \right\rangle \\ &\quad \left. \begin{array}{l} + i\hbar \hat{H}^\dagger(t) \langle \psi(t) | \\ -i\hbar H(t) | \psi(t) \rangle \end{array} \right\} \\ &= i\hbar \langle \psi(t) | \hat{H}(t) \hat{A}(t) - \hat{H}(t) \hat{A}(t) | \psi(t) \rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}(t) \right\rangle \end{aligned}$$

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{\hbar} \langle [\hat{H}(t), \hat{A}(t)] \rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}(t) \right\rangle}$$

zeitliche Entwicklung \(\Leftrightarrow\) Kommutator mit dem Hamilton-Operator

Ehrenfest - Theorem

Teilchen in skalarem Potential $V(\hat{r})$

$$\hat{H}(\hat{r}, \hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r})$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{r} \rangle = \frac{1}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{r}] \rangle = \frac{1}{\hbar} \left(-\frac{\hbar}{m} \langle \hat{p} \rangle \right) = \frac{\langle \hat{p} \rangle}{m} \quad (\text{I})$$

$$= \frac{1}{2m} [\hat{p}^2, \hat{r}] + \underbrace{[V(\hat{r}), \hat{r}]}_{=0} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} \underbrace{[\hat{p}, \hat{r}]}_{-i\hbar} + \underbrace{[\hat{p}, \hat{r}]}_{-i\hbar} \hat{p} \right)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle = \frac{1}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{p}] \rangle$$

$$= \frac{1}{2m} \underbrace{[\hat{p}^2, \hat{p}]}_{=0} + \underbrace{[V(\hat{r}), \hat{p}]}_{=-\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} V(\hat{r})}$$

$$= -\langle \vec{\nabla} V(\hat{r}) \rangle \quad (\text{II})$$

$$\text{NR: } [V(\hat{r}), \hat{p}] \psi(\hat{r})$$

$$= V(\hat{r}) \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \psi(\hat{r}) - \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} (V(\hat{r}) \psi(\hat{r}))$$

$$= -\frac{\hbar}{i} (\vec{\nabla} V(\hat{r})) \psi(\hat{r})$$

$$\Rightarrow \frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{r} \rangle \stackrel{\text{w}}{=} \frac{1}{m} \frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle = -\frac{1}{m} \langle \vec{\nabla} V(\hat{r}) \rangle$$

$$\Rightarrow m \frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{r} \rangle = \underbrace{-\langle \vec{\nabla} V(\hat{r}) \rangle}_{= \langle \vec{F}(\hat{r}) \rangle}$$

Bewegungsgleichungen der Mittelwerte nahezu identisch zur klassischen Mechanik!